計算工学講演会論文集　Vol.28 (2023年5月)　　計算工学会

MPH-I法を高速化するマルチグリッド前処理ソルバー

Multi-grid preconditioned solver for accelerating the Moving Particle Hydrodynamic method for Incompressible flows (MPH-I)

近藤雅裕[1)]，松本純一[1)]，澤田有弘[1)]
Masahiro Kondo, Junichi Matsumoto, Tomohiro Sawada

1) 博(工) 産業技術総合研究所（〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 中央第2, E-mail: kondo.masahiro@aist.go.jp)

A multigrid preconditioned solver was developed for the moving particle hydrodynamics method for incompressible flows (MPH-I method), which is a physically consistent particle method adopting the time integration algorithm where both the pressure and velocity are implicitly treated at the same time. By constructing the bucket based geometric multigrid preconditioner, the scalability was obtained in spite of the matrix equation which is non-diagonally dominant, having a lot of nonzero elements and large condition number. The performance of the multigrid solver was presented by comparing number of iterations with the conventional conjugate gradient method without preconditioning.

Key Words : *Particle methods, SPH, MPS, MPH, Implicit calculation, Multigrid solver, Scalability*

1.　はじめに

粒子法[1,2]は、複雑な自由表面の運動を粒子の移動により直接的に追跡できる流体の計算手法であり、その特徴を活かして、工学的問題に幅広く用いられている。Moving Particle Hydrodynamics (MPH)法[3,4,5,6]は、代表的な粒子法であるSPH法[1]およびMPS法[2]における空間離散化の考え方を踏襲しつつも、粒子法の離散式を解析力学的な枠組みに当てはめまるように修正することで、従来、経験的緩和によって対処せざるを得なかった力学的不安定を取り除いた粒子法である。解析力学的な枠組みを利用して力学的な安定性を担保した性質を、物理的健全性と呼んでおり、MPH法は、SPH法およびMPS法の1種でありつつも、物理的健全性を有する粒子法といえる。

MPH法では空間離散化に伴う力学的不安定は生じないため、時間積分を安定に実行できれば計算結果が得られる。時間積分に陰解法を適用すれば、安定に結果を得るために満たすべき条件が、速度に関するクーラン条件のみとなり、非常に大きな体積弾性率や体積粘性率をほとんど無条件で扱えるようになる。実際、時間積分に陰解法を採用した圧力速度同時陰解法[3]が提案され、その後、係数行列を正定値対称化することでConjugated Gradient（CG）法などのよく知られた解法で確実に解けるようにした圧力代入型陰解法[6]へと発展した。しかし、単純なCG法を用いる場合、問題の規模が大きくなるにつれて、反復回数が増大するため、スケーラビリティの観点で課題が残る。反復回数が問題の規模に依存しない行列解法として、マルチグリッド法[7]が知られており、粒子法の圧力ポアソン方程式を解くためにもマルチグリッド法が用いられている[8]。しかし、MPH-I法で扱う行列方程式は、圧力ポアソン方程式に対応する行列方程式よりも複雑であり、対角優位性、条件数、非ゼロ成分の数の点で解きにくい。

本研究では、MPH-I法の行列方程式を対象として、マルチグリッド前処理ソルバーを開発する。具体的には、先行研究[8]の知見に倣い、バックグラウンドセルを用いた幾何学的マルチグリッド（BMG）を構築する。さらに、高粘性非圧縮ダム崩壊問題を用いて、前処理なしのCG法とマルチグリッド前処理CG法の反復回数を比較し、マルチグリッド前処理の有効性を確認する。

2.　MPH法で解くべき行列方程式

MPH法では、ナビエストークス方程式

$$\rho_0 \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla\Psi + \mu\nabla^2\mathbf{u} + \rho\mathbf{g} \tag{1}$$

および、圧力計算式

$$\Psi = -\lambda\nabla\cdot\mathbf{u} + \kappa\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \tag{2}$$

を支配方程式として採用し、重み関数

$$w_{ij} = w\,(|\mathbf{r}_{ij}|)$$

$$w\,(r) = \begin{cases} \dfrac{1}{S}\dfrac{1}{h^d}\left(1-\dfrac{r}{h}\right)^2 & (r \le h\,) \\ 0 & (r > h\,) \end{cases} \tag{3}$$

$$S = \int_{r<h}\frac{1}{h^d}\left(1-\frac{r}{h}\right)^2 dv$$

を用いて空間離散化する。時間積分にEuler陰解法を適用し、圧力を代入消去して得られる行列方程式は、

$$\begin{aligned} &\rho_0\frac{\mathbf{u}_i^{k+1}}{\Delta t} + 2\mu(d+2)\sum_j\left((\mathbf{u}_j^{k+1}-\mathbf{u}_i^{k+1})\cdot\mathbf{e}_{ij}\right)\mathbf{e}_{ij}\frac{w_{ij}^{v\prime}}{|\mathbf{r}_{ij}|} \\ &-\lambda\sum_j\left(\sum_n\left(\mathbf{u}_n^{k+1}-\mathbf{u}_j^{k+1}\right)\cdot\mathbf{e}_{jn}w_{jn}^{p\prime} + \sum_m\left(\mathbf{u}_m^{k+1}-\mathbf{u}_i^{k+1}\right)\cdot\mathbf{e}_{im}w_{im}^{p\prime}\right)\mathbf{e}_{ij}w_{ij}^{p\prime} \\ &= \rho_0\frac{\mathbf{u}_i^k}{\Delta t} + \sum_j\left(\kappa(n_j^p-n_0^p)+\kappa(n_i^p-n_0^p)\right)\mathbf{e}_{ij}w_{ij}^{p\prime} + \rho_0\mathbf{g} \end{aligned} \tag{4}$$

とあらわされる（詳細は文献[6]参照）。式(4)の未知数は

速度ベクトル$\mathbf{u}$である。

3. 幾何学的マルチグリッド法

幾何学的マルチグリッド法の構築にあたっては、階層的に制限と補完を定義する必要がある。ここでは、粒子からセルへの制限に際しては、セルに含まれる粒子の変数を

$$\mathbf{u}_l^0 = \sum_{i \in l} \mathbf{u}_i \tag{5}$$

と足し合わせ、セルから粒子への補完に際しては、制限行列と補完行列が転置の関係となるように定義した。また、図1のように細かいセル4つで粗いセル1つをなすように幾何構造を定義し、細かいセルから粗いセルへの制限に際しては、

$$\mathbf{u}_l^{r+1} = \sum_{s \in l} \mathbf{u}_s^r \tag{6}$$

と足し合わせを利用し、粗いセルから細かいセルへの補完に際しては、制限行列と補完行列が転置の関係となるように与えた。

また、マルチグリッド前処理においては、ヤコビ法ベースのスムーザーを用いて各階層で数回の反復を行うVサイクルを適用した。

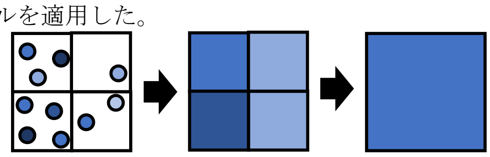

図1 マルチグリッド法の幾何学的階層構造

表1 高粘性非圧縮ダム崩壊計算（計算条件）

パラメータ	値
粒子径 l	$1.0\text{x}10^{-3}$ ~ $1.5625\text{x}10^{-5}$ m
時間刻み幅 Δt	$1.0\text{x}10^{-3}$ ~ $1.5625\text{x}10^{-5}$ s
重力 g	10 m/s^2
せん断粘性 μ	10 Pas
体積粘性 λ	10^4 Pas
体積弾性 κ	10^6 Pa
密度 ρ	10^3 kg/m^3
影響半径比 r_{ep}/l, r_{ev}/l	1.75, 3.5

4. 高粘性非圧縮ダム崩壊計算の例

表1に示す計算条件を用いて図2に示す高粘性ダム崩壊計算を様々な粒子径を用いて実行し、反復回数を比較した。図3に前処理なしCG法およびマルチグリッド前処理CG法を用いた場合の、t=0.2sにおける反復回数を示す。問題が大規模化するにつれて、前処理なしCG法では反復回数が明らかに増大するのに対して、マルチグリッドCG法では反復回数が抑制されており、マルチグリッド前処理の有効性が確認できる。

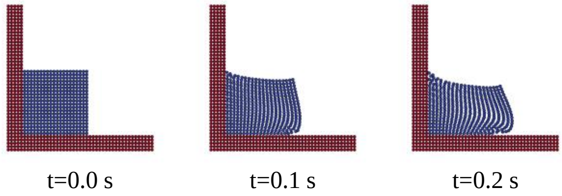

図2 高粘性非圧縮ダム崩壊計算（計算体系）

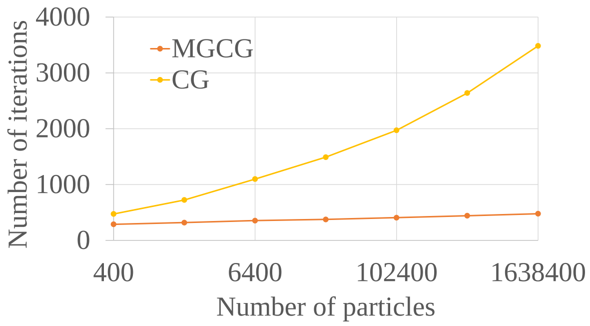

図3 ソルバー反復回数(MGCG, CG (t=0.2s))

5. おわりに

MPH-I法の行列方程式を対象として、マルチグリッド前処理ソルバーを開発した。非対角優位で、条件数が大きく、非ゼロ要素が多い行列方程式にもかかわらず、スケーラビリティが確認され、マルチグリッド前処理の有効性が示された。

参考文献

[1] J.J. Monaghan, Simulating free surface flows with SPH, Journal of Computational Physics 110 (1994) 399-406

[2] S. Koshizuka and Y. Oka, Moving-Particle Semi-Implicit methods for fragmentation of incompressible fluid, Nuclear Science and Engineering 123 (1996) 421-434

[3] M. Kondo, A physically consistent particle method for incompressible fluid flow calculation, Computational Particle Mechanics 8 (2021) 69-86.

[4] 近藤雅裕, 松本純一, 空間離散化された系が物理的健全性を有する微圧縮粒子法, JSCES, Paper No. 20210006.

[5] M. Kondo, T. Fujiwara, I. Masaie, J. Matsumoto, A physically consistent particle method for high-viscous free-surface flow calculation, Computational Particle Mechanics (2021)

[6] 近藤雅裕, 松本純一, 高粘性非圧縮MPH法を高速化する圧力代入型陰解法, JSCES, Paper No. 20210016.

[7] U. Trottenberg, C. W. Oosterlee, A. Schuller, Multigrid, Elsevier (2000)

[8] A. Södersten, T. Matsunaga, S. Koshizuka, Bucket-based multigrid preconditioner for solving pressure Poisson equation using a particle method, Computers and Fluids (2019) 104242